

A TANTÁRGY ADATLAPJA

Szerkezet vizsgálat

Egyetemi tanév 2026-2027

1. A képzési program adatai

1.1. Felsőoktatási intézmény	Babeş-Bolyai Tudományegyetem, Kolozsvár
1.2. Kar	Kémia és Vegyészmérnöki Kar
1.3. Intézet	Magyar Kémia és Vegyészmérnöki Intézet
1.4. Szakterület	Kémia
1.5. Képzési szint	Alapképzés (BSc, BA)
1.6. Tanulmányi program/ Képesítés	Kémia/ Vegyész diploma
1.7. Képzési forma	Nappali tagozat

2. A tantárgy adatai

2.1. A tantárgy neve	Szerkezet vizsgálat			A tantárgy kódja	CLM2076
2.2. Az előadásért felelős tanár neve	Conf. Dr. Gál Emese				
2.3. A szemináriumért felelős tanár neve	Conf. Dr. Gál Emese				
2.4. Tanulmányi év	III	2.5. Félév	6	2.6. Értékelés módja	Vizsga
2.7. Tantárgy rendszere	Kötelező			2.8. Tantárgy típusa	Szaktárgy

3. Teljes becsült idő (az oktatási tevékenység féléves óraszama)

3.1. Heti óraszám	4	melyből: 3.2. előadás	2	3.3. szeminárium/labor/projekt	1/1
3.4. Tantervben szereplő összóraszám	56	melyből: 3.5. előadás	28	3.6 szeminárium/labor	28
3.5 Az egyéni tanulmányi idő (ET) és az önképzési tevékenységekre (ÖT) szánt idő elosztása:					óra
3.5.1. A tankönyv, a jegyzet, a szakirodalom vagy saját jegyzetek tanulmányozása (ET)					26
3.5.2. Könyvtárban, elektronikus adatbázisokban vagy terepen való további tájékozódás					10
3.5.3. Szemináriumok/ laborok, házi feladatok, portfóliók, referátumok, esszék kidolgozása (nagyobb vagy egyenlő a tantárgy naptárában az ellenőrzési feladatokra előírt összórással)					26
3.5.4. Egyéni készségfejlesztés (tutorálás)					5
3.5.5. Vizsgák					2
3.5.6. Más tevékenységek:					-
3.7. Egyéni tanulmányi idő (ET) és önképzési tevékenységekre (ÖT) szánt idő összórássága				69	
3.8. A félév összórássága				125	
3.9. Kreditszám				5	

4. Előfeltételek (ha vannak)

4.1. tantervi	Általános kémia Szerves kémia
4.2. kompetenciabeli	Szerves kémia fogalmak, dokumentálás és informálás, egyéni munka, információs technológia használata, adatgyűjtés és feldolgozás.

5. Feltételek (ha vannak)

5.1. Az előadás lebonyolításának feltételei	• Az interaktív részvétel ösztönzése. Elvárt a pontos megjelenés. • A hallgatók hozzáférhetnek az adatbázisokhoz (egyetemi, valamint a központi könyvtár által előfizetett szakirodalmi adatbázisok) • Az előadásokhoz szükséges technikai eszközök (számítógép, szükséges szoftver, video kivetítő) • A hallgatók kikapcsolt mobiltelefonnal jelenjenek meg az előadáson
5.2. A szeminárium/ labor lebonyolításának feltételei	• A hallgatói részvétel a szemináriumon kötelező.

	•Elvárt a pontos megjelenés. A hallgatók kikapcsolt mobiltelefonnal jelenjenek meg a szemináriumon. A kiadott házi feladatok önálló megoldása, és bemutatása.
--	---

6.1. A tanulmányi program elvégzése során elsajátított kompetenciák (a tantervből kell átvenni)¹

Szakmai kompetenciák	
Kompetencia kódja	Kompetencia
CP3	Tudományos módszerek alkalmazása kémiai vegyületek összetételének, szerkezetének és fizikai-kémiai tulajdonságainak meghatározására.
CP11	Kémiai elemzési folyamatok kezelése vagy Kémiai analitikai eljárások menedzselése
CP12	Kémiai minták előkészítése
CP15	Kémiai analitikai berendezések használata
CP17	Specifikus szoftverek és informatikai eszközök használata
Transzverzális kompetenciák	
Kompetencia kódja	Kompetencia
CT1	Szakmai feladatok hatékony és felelősségteljes elvégzése, a területre vonatkozó jogszabályok és etikai normák betartásával, szakképzett felügyelet mellett.

6.2. A tanulmányi programra jellemző képzési eredmények (a tantervből kell átvenni)²

A tantárgy által megcélzott tanulási eredmények		
Kompetencia kódja	Ismeret és megértés (Knowledge and understanding)	Specifikus tudományos készségek (Specific academic skills)
CP2, CP5, CP11, CP15, CP17, CP18	1. A hallgató/diplomás érti és megtervezi a fizikai-kémiai elemzési stratégiákat az analitikai elválasztási technikák, a spektroszkópiai és számítási módszerek, valamint a kemometriai fogalmak integrálásával a kémiai vegyületek azonosítása, mennyiségi meghatározása és jellemzése érdekében.	1. A hallgató/diplomás spektrokémiai módszerekkel komplex mintákat dolgoz fel és elemez, valamint molekulaszervezeteket validál a kísérleti eredmények és a digitális szimulációkkal generált elméleti modellek integrálása révén.

7. Tárgy-specifikus tanulási eredmények (minden tantárgyfelelős a tanulmányi program szintjének kompetenciáit és tanulási eredményeit összefoglaló táblázatából vezeti be)

Ismeret és megértés (Knowledge and understanding)
1. Ismeri az elektromágneses sugárzás és a szerves anyag közötti kölcsönhatás fizikai alapelveit az UV-vis (ultraibolya-látható), az IR (infravörös), az RMN (mágneses magrezonancia) és a tömegspektrometria területén
2. Felismeri és összefüggésbe hozza az IR-spektrumok specifikus rezgési frekvenciáit a kémiai kötések és funkciók csoportok rezgési módjaival (vegyérték- és deformációs rezgések).
3. Megérti és leírja a tömegspektrometria fragmentációs mechanizmusait (elektronütközéses ionizáció, retro-Diels-Alder típusú fragmentáció, McLafferty-átrendeződés) a molekulaváz meghatározása érdekében.

¹ A tanulmányi program tantervéből át kell venni azokat a szakmai és/vagy transzverzális kompetenciákat, amelyek fejlesztéséhez az a tantárgy is hozzájárul, amelyhez az adott tantárgyi adatlap készült. Minden kompetencia esetében változatlan formában át kell venni a teljes kijelentést, beleértve a kompetencia kódját is, ahogyan a tantervben megjelenik. Amennyiben a két kategória közül valamelyikből nem vesznek át kompetenciákat, a táblázatban az adott kategóriának megfelelő sort törölni kell.

² Meg kell említeni a tanulmányi programra jellemző képzési eredményeket, amelyek fejlesztéséhez az a tantárgy is hozzájárul, amelyhez az adott tantárgyi adatlap készült. A tantárgy típusának (alaptárgy/szaktárgy/kiegészítő tárgy) megfelelő jellemzőket változatlan formában kell átvenni a tantervből, és a kapcsolódó kompetencia jobb oldalán kell feltüntetni.

4. Megmagyarázza a nukleáris mágneses rezonancia jelenségét, beleértve az elektronos árnyékolás/árnyékoltság megszüntetésének (deshielding) fogalmát, a kémiai eltolódást és a spin-spin csatolást.
Specifikus tudományos készségek (Specific academic skills)
1. Képes a spektrális jelek hozzárendelésére a molekula konkrét szerkezeti elemeihez (a tömegspektrometriás fragmentációs csúcsok, az infravörös abszorpciós sávok és az RMN rezonanciajelek dedukciója).
2. Képes a különböző spektrumokból (MS, IR, 1H-RMN, 13C-RMN) származó adatok összevetésére egy ismeretlen szerves vegyület teljes kémiai szerkezetének meghatározása érdekében.
3. Speciális szoftverek alkalmazása a nyers mérési adatok feldolgozására (jelek integrálása, J-csatolási állandók kiszámítása, multiplicitás elemzése).
4. Képes egy szerves vegyület tisztasági fokának megítélésére az RMN- vagy IR-spektrumokban megjelenő idegen jelek (pl. oldószermaradványok, melléktermékek) elemzése révén.
5. Képes a szerkezetvizsgálati eredmények szabványosított tudományos formátumban történő prezentálására.
6. Logikailag alátámasztott, spektrális bizonyítékokon alapuló következtetések megfogalmazása a javasolt anyagszerkezet igazolására.

8. A tantárgy tartalma

8.1 Előadás	Didaktikai módszerek	Megjegyzések ³
8.1.1. A szerves kémia kutatásának szakaszai. Szerves anyagok elválasztási és tisztítási módszerei. GC és HPLC analízisek és kiértékelése.	Előadás, leírás, magyarázat, beszélgetés	Előadás (2 óra) A kurzus anyagával kapcsolatos beszélgetésekben, vitában való részvétel. Válaszok a diákok kérdéseire.
8.1.2. Bevezetés a szerves vegyületek szerkezet felderítésébe. Elemi analízis. A szerkezet meghatározása diffrakciós módszerekkel (röntgensugarak, neutronok és elektronok) és fotoelektron módszerrel (PES XPS és UPS).	Előadás, leírás, magyarázat, beszélgetés	Előadás (2 óra) A kurzus anyagával kapcsolatos beszélgetésekben, vitában való részvétel. Válaszok a diákok kérdéseire.
8.1.3. UV-Vis, FL spektroszkópiák, kromofor csoportok, Lambert-Beer törvény	Előadás, leírás, magyarázat, beszélgetés	Előadás (2 óra) A kurzus anyagával kapcsolatos beszélgetésekben, vitában való részvétel. Válaszok a diákok kérdéseire.
8.1.4. FT-IR spektroszkópia, berendezés működése, spektrumok felvétele.	Előadás, leírás, magyarázat, beszélgetés	Előadás (2 óra) A kurzus anyagával kapcsolatos beszélgetésekben, vitában való részvétel. Válaszok a diákok kérdéseire.
8.1.5. FT-IR Kiválasztási szabályok, a rezgések típusai, szerkezeti tényezők, amelyek befolyásolják a csoportokra jellemző frekvenciákat. Spektrumok kiértékelése.	Előadás, leírás, magyarázat, beszélgetés	Előadás (2 óra) A kurzus anyagával kapcsolatos beszélgetésekben, vitában való részvétel. Válaszok a diákok kérdéseire.
8.1.6. RAMAN spektroszkópia, kiértékelése	Előadás, leírás, magyarázat, beszélgetés	Előadás (2 óra) A kurzus anyagával kapcsolatos beszélgetésekben, vitában való részvétel. Válaszok a diákok kérdéseire.
8.1.7. Tömegspektrometria (MS), felépítése, működése, alapfogalmak, általános fragmentációs szabályok. Ionizáció típusok.	Előadás, leírás, magyarázat, beszélgetés	Előadás (2 óra) A kurzus anyagával kapcsolatos beszélgetésekben, vitában való részvétel. Válaszok a diákok kérdéseire.

³ Például szervezési szempontok, ajánlások a hallgatók számára, a kurzushoz/szemináriumhoz kapcsolódó konkrét szempontok, mint például a területen dolgozó szakemberek meghívása stb.

8.1.8. Főbb fragmentációs szabályok EI-MS ionizáció során. Fontosabb vegyülettípusok fragmentációja.	Előadás, leírás, magyarázat, beszélgetés	Előadás (2 óra) A kurzus anyagával kapcsolatos beszélgetésekben, vitában való részvétel. Válaszok a diákok kérdéseire.
8.1.9. Mágneses magrezonancia spektroszkópia-NMR elméleti háttér.	Előadás, leírás, magyarázat, beszélgetés	Előadás (2 óra) A kurzus anyagával kapcsolatos beszélgetésekben, vitában való részvétel. Válaszok a diákok kérdéseire.
8.1.10. Mágneses magrezonancia spektroszkópia- proton -1H NMR szerkezeti paraméterei.	Előadás, leírás, magyarázat, beszélgetés	Előadás (2 óra) A kurzus anyagával kapcsolatos beszélgetésekben, vitában való részvétel. Válaszok a diákok kérdéseire.
8.1.11. Mágneses magrezonancia spektroszkópia- kémiai eltolódás, árnyékolási állandóra ható tényezők, Karplus egyenlet.	Előadás, leírás, magyarázat, beszélgetés	Előadás (2 óra) A kurzus anyagával kapcsolatos beszélgetésekben, vitában való részvétel. Válaszok a diákok kérdéseire.
8.1.12. Mágneses magrezonancia spektroszkópia- spin-spin csatolás, csatolási rendszerek, az 1H-NMR egyszerűsítésének lehetősége.	Előadás, leírás, magyarázat, beszélgetés	Előadás (2 óra) A kurzus anyagával kapcsolatos beszélgetésekben, vitában való részvétel. Válaszok a diákok kérdéseire.
8.1.13. Mágneses magrezonancia spektroszkópia - 13C-NMR szerkezeti paraméterei.	Előadás, leírás, magyarázat, beszélgetés	Előadás (2 óra) A kurzus anyagával kapcsolatos beszélgetésekben, vitában való részvétel. Válaszok a diákok kérdéseire.
8.1.14. A molekulaszervezet hozzárendelése MS, UV-Vis, IR és NMR spektrumok kombinált értelmezésével	Előadás, leírás, magyarázat, beszélgetés	Előadás (2 óra) A kurzus anyagával kapcsolatos beszélgetésekben, vitában való részvétel. Válaszok a diákok kérdéseire.

Könyvészet

1. Kurzus alap (ppt)
2. Gal Emese, Brem Balazs, Szerves vegyületek szerkezetfelderítése-Egyetemi jegyzet, Presa Universitara Clujeana, 2020
3. L. D. Field, S. Sternhell, J.R. Kalman, „Organic structures from spectra” John Wiley and Sons, 2007;
4. E. Pretsch, T. Clerc, J. Seibl, W. Simon, Tables of Spectral Data.for Structure Determination of Organic Compounds, second edition, Springer-Verlag, 1989.
5. I. Pogany, M. Banciu, “Metode fizice în chimia organică” ed. Stiințifică, București 1972.
6. S. Mager, «Analiza Structurală Organică» Ed St. Enciclopedică, București 1979.
7. B. Stuart „IR spectroscopy fundamentals and applications” John Wiley and Sons, 2004

8.2 Szeminárium/ Labor	Didaktikai módszerek	Megjegyzések
8.2.1. Electromágneses sugárzás tulajdonságai.	Magyarázat, beszélgetés, eset tanulmány.	A szemináriumi tevékenységeken a jelenlét kötelező, maximum 20% igazolt hiányzás engedhető meg
8.2.2. UV-Vis spektrometria, minta kondicionálás, spektrum rögzítés, strukturális hozzárendelések az UV-Vis spektrumokban rögzített jellemző abszorpciók alapján.	UV-vis spektrumok felvétele és kiértékelése. Magyarázat, példák megoldása, esettanulmány.	1 szeminárium (1 óra/ szeminárium) 1 laboratóriumi gyakorlat
8.2.3. FT-IR spektrométerek, minta kondicionálás és IR spektrum rögzítés.	FT-IR spektrumok felvétele és kiértékelése. Magyarázat, beszélgetés, példák megoldása, esettanulmány.	1 laboratóriumi gyakorlat

8.2.4. MS spektrométerek, spektrum rögzítés, strukturális hozzárendelések specifikus fragmentációk alapján.	Szerves vegyületek MS-spektrumainak értelmezése. EI-MS spektrumok értelmezése. Magyarázat, beszélgetés, példák megoldása, esettanulmány	1 laboratóriumi gyakorlat
8.2.5. NMR spektrométerek, minta kondicionálás, NMR spektrum felvétel (1H és 13C)	Spektrum felvétel. A spektrumok értelmezése, esettanulmány	1 laboratóriumi gyakorlat
8.2.6. 1H-NMR spektrumok kémiai eltolódásainak hozzárendelése szerves vegyületek szerkezetéhez.	1H NMR kiértékelése, példák megoldása, esettanulmány	1 szeminárium
8.2.7.-8 1H-NMR spektrum kiértékelések, csatolási állandók és integrál jelek szerkezeti hozzárendelések.	1H NMR kiértékelése, példák megoldása, esettanulmány	2 szeminárium
8.2.9. Szerkezet meghatározás a 13C NMR spektrumok kiértékelése alapján.	Magyarázat, beszélgetés, példák megoldása, esettanulmány	1 szeminárium
8.2.10. -11. Szerkezet meghatározás a 1H és 13C NMR spektrumok kiértékelése alapján.	Magyarázat, beszélgetés, példák megoldása, esettanulmány	2 szeminárium
8.2.12.-14. A szerves vegyületek szerkezetének felderítése FT-IR, UV-Vis, MS és NMR spektrumok kombinált értelmezésével.	Magyarázat, beszélgetés, példák megoldása, esettanulmány	3 szeminárium
Könyvészet 1.Kurzus alap (ppt) 2.Gal Emese, Brem Balazs, Szerves vegyületek szerkezetfelderítése-Egyetemi jegyzet, Presa Universitara Clujeana, 2020 3.L. D. Field, S. Sternhell, J.R. Kalman, „Organic structures from spectra” John Wiley and Sons, 2007; 4.E. Pretsch, T. Clerc, J. Seibl, W. Simon, Tables of Spectral Data.for Structure Determination of Organic Compounds, second edition, Springer-Verlag, 1989. 5. I. Pogany, M. Banciu, “Metode fizice în chimia organică” ed. Stiințifică, București 1972. 6. S. Mager, «Analiza Structurală Organică» Ed St. Enciclopedică, București 1979. 7.B. Stuart „IR spectroscopy fundamentals and applications” John Wiley and Sons, 2004		

9. Értékelés

Tevékenység típusa	9.1 Értékelési kritériumok ⁴	9.2 Értékelési módszerek ⁵	9.3 Aránya a végső jegyben
--------------------	---	---------------------------------------	----------------------------

⁴ Az értékelési kritériumoknak közvetlenül tükrözniük kell a tanulmányi program és a tantárgy szintjén kitűzött képzési eredményeket. Pontosabban, a várható képzési eredményeknél felsorolt eredményeket értékelik.

⁵ Javasolt mind a végső kiértékelési módszerek, mind a folyamatos kiértékelési stratégia meghatározása.

9.4 Előadás	A vizsgán való részvétel feltétele, hogy a szeminárium az összes óra legalább 90%-án jelenjen meg a hallgató. A vizsgán való részvétel feltétele a szeminárium keretén belül kapott feladatok helyes megoldása. Az IR, UV-Vis, NMR és tömegspektroszkópia alapját képező fizikai-kémiai elvek ismerete. Az egyes tanulmányozott spektroszkópiai módszerek tipikus spektrális paramétereinek ismerete. Képesség a helyes szerkezeti hozzárendelések elvégzésére az egyes tanulmányozott spektroszkópiai módszerek specifikus spektrális paramétereinek kombinált elemzése alapján.	Írásbeli vizsga. A minősítés 1-10. Írásbeli vizsga: Elméleti rész: Az FT-IR, UV-Vis, NMR és MS spektrumok értelmezése alapján a szerkezet meghatározása. A vizsgára való belépés feltétele: A szemináriumok során kapott feladatok megoldása. A vizsgán történő csalás-szándék a vizsgáról való kizárással büntetendő. A vizsgán történő csalás az UBB ECST-szabályzata szerint az egyetemről való eltanácsolással jár.	100%
9.5 Szeminárium/ Labor	A feladatok helyes megoldása. Az előadás és a szeminárium témaköreinek elsajátítása és megértése alapján.	A molekuláris szerkezet hozzárendelése két szokásos vegyülethez az IR, UV-Vis, NMR és MS spektrumok értelmezése alapján. A szemináriumon való részvétel feltétele a vizsgán való részvételnek. A vizsgán való részvétel a szemináriumi feladatok megoldásának a feltételéhez kötött.	0%
9.6 A teljesítmény minimumkövetelményei			
- Minimum 5-ös osztályzat elérése a vizsgán a javítókulcs pontozási útmutatója alapján. Egy ismeretlen vegyületnek spektroszkópiás elemzés alapján ajánlani egy lehetséges szerkezetet. - A szerkezetvizsgálat alapfogalmainak ismerete, az alapvető spektroszkópiás módszerek jellemző spektrális paramétereinek ismerete.			

10. SDG-ikonok (Fenntartható fejlődési célok/ Sustainable Development Goals)⁶

		A fenntartható fejlődés általános ikonja						
								

⁶ Válasszon ki egyetlen olyan ikont, amely az *Egyetemi folyamatban történő alkalmazására vonatkozó eljárás* szerint legjobban illeszkedik az adott tantárgyhoz. Ha a tantárgy általánosságban foglalkozik a fenntartható fejlődéssel (pl. bemutatja/bevezeti a fenntartható fejlődés általános kereteit stb.), akkor a Fenntartható Fejlődés általános ikonja rendelhető hozzá. Ha egyetlen ikon sem vonatkozik a tantárgyra, válassza az utolsó opciót: „Nem alkalmazható”.

								Nem alkalmazható
--	--	--	--	--	--	--	--	------------------

Kitöltés időpontja:

20 Aprilis 2026

Előadás felelőse:

Conf. dr. Gál Emese

Szeminárium felelőse:

Conf. dr. Gál Emese

Az intézeti jóváhagyás dátuma: 27 aprilis .2026

Intézetigazgató: Prof. dr. ing. PAIZS Csaba